



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA



Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica

Carrera de Petroquímica

Trabajo de Unidad de Integración Curricular

Tema: “Cálculo de las proporciones estequiométricas, balances de masa, rendimientos reales y teóricos del polímero comercial polietileno (PE)”.

Autor:

Chiluisa Sánchez, Alex Dario

Tutor:

Ing. Robalino Cacuango, Milton Javier, Mgtr.



CONTENIDOS

INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

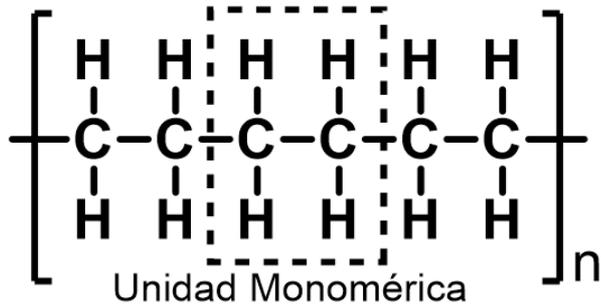
ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES

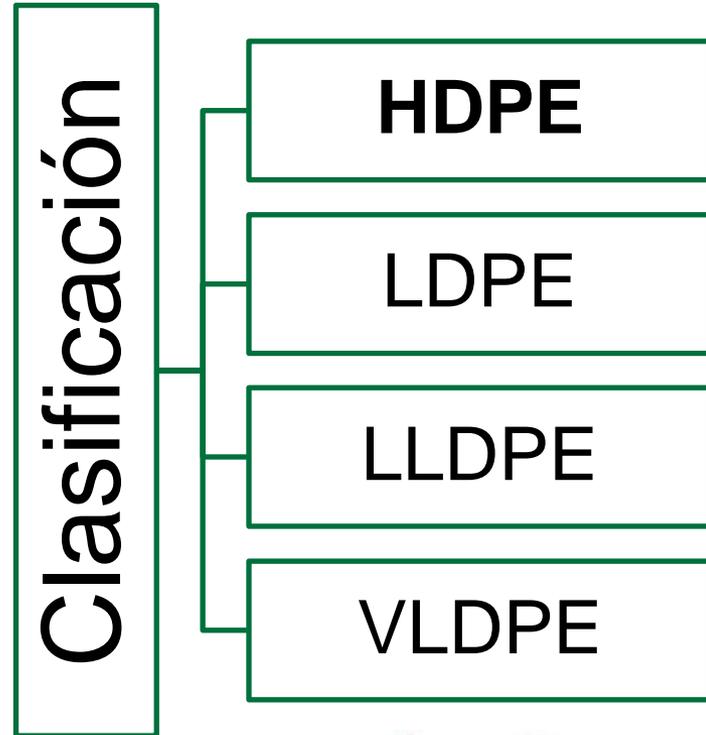


Introducción

¿Qué es?

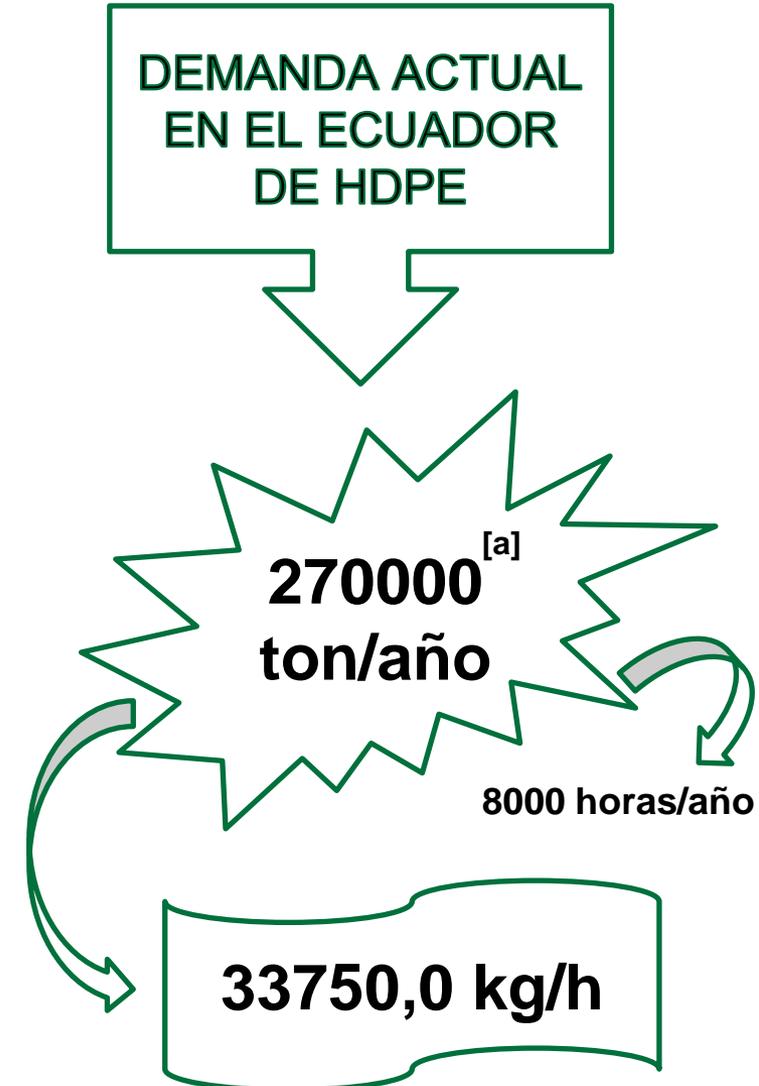
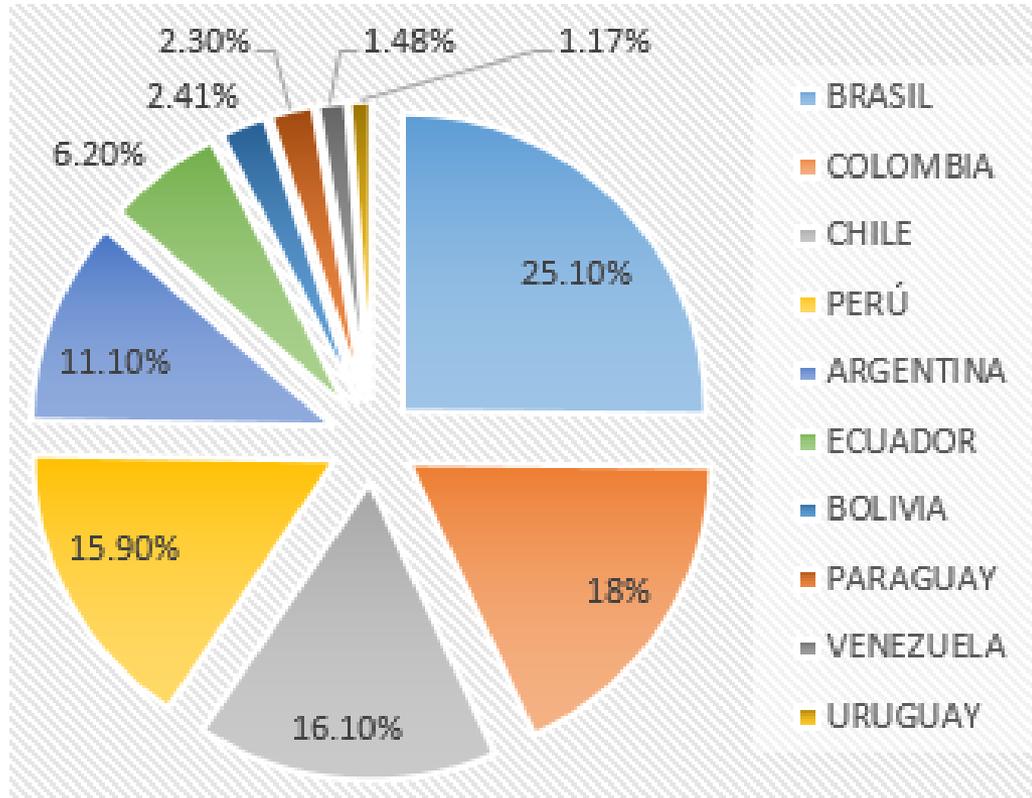


Polietileno



Introducción

Importadores de HDPE en América Latina



[a]: Instituto Nacional de Estadísticas y Censos (INEC)



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

Comparación de las tecnologías de proceso industriales para la producción del HDPE

	Solución	Suspensión	Fase gas
Licenciante	Dow	Chevron Phillips	Univation
Tecnología de proceso	Dowlex	Slurry Loop	Unipol
Tipo de reactor	CSTR´s	CSTR´s	Lecho fluidizado
Presión [atm]	20-30	35-40	30-35
Temperatura [°C]	140-200	85-110	80-105
Catalizador	Ziegler-Natta	Ziegler-Natta	Phillips
Densidad [g/cm³]	0.910-0.935	0.921-0.938	0.941-0.963
Capacidad de planta [ton/año]	290 000	120 000	650 000



Comparación de las tecnologías de proceso industriales para la producción del HDPE

	Solución	Suspensión	Fase gas
Licenciante	Dow	Chevron Phillips	Univation
Tecnología de proceso	Dowlex	Slurry Loop	Unipol
Tipo de reactor	CSTR´s	CSTR´s	Lecho fluidizado
Presión [atm]	20-30	35-40	30-35
Temperatura [°C]	140-200	85-110	80-105
Catalizador	Ziegler-Natta	Ziegler-Natta	Phillips
Densidad [g/cm³]	0.910-0.935	0.921-0.938	0.941-0.963
Capacidad de planta [ton/año]	290 000	120 000	650 000



CONTENIDO

INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

OBJETIVOS

Objetivo general

Calcular las proporciones estequiométricas, balances de masa, rendimientos reales y teóricos del polímero comercial polietileno (HDPE).



OBJETIVOS

Objetivos específicos

- Revisar el estado del arte de las tecnologías, reactivos, catalizadores y condiciones de operación a utilizarse en la producción del HDPE.
- Elaborar la reacción de polimerización de acuerdo a la tecnología más apropiada en la obtención del HDPE.
- Ejecutar los balances de masa, estructurando la estequiometría propia de la reacción.
- Contrastar los rendimientos teóricos y reales acorde a la tecnología más utilizada en la producción del HDPE a nivel industrial.
- Ejecutar un análisis de retrosíntesis online con el propósito de comparación e interpretación mediante ingeniería inversa.



CONTENIDO

INTRODUCCIÓN

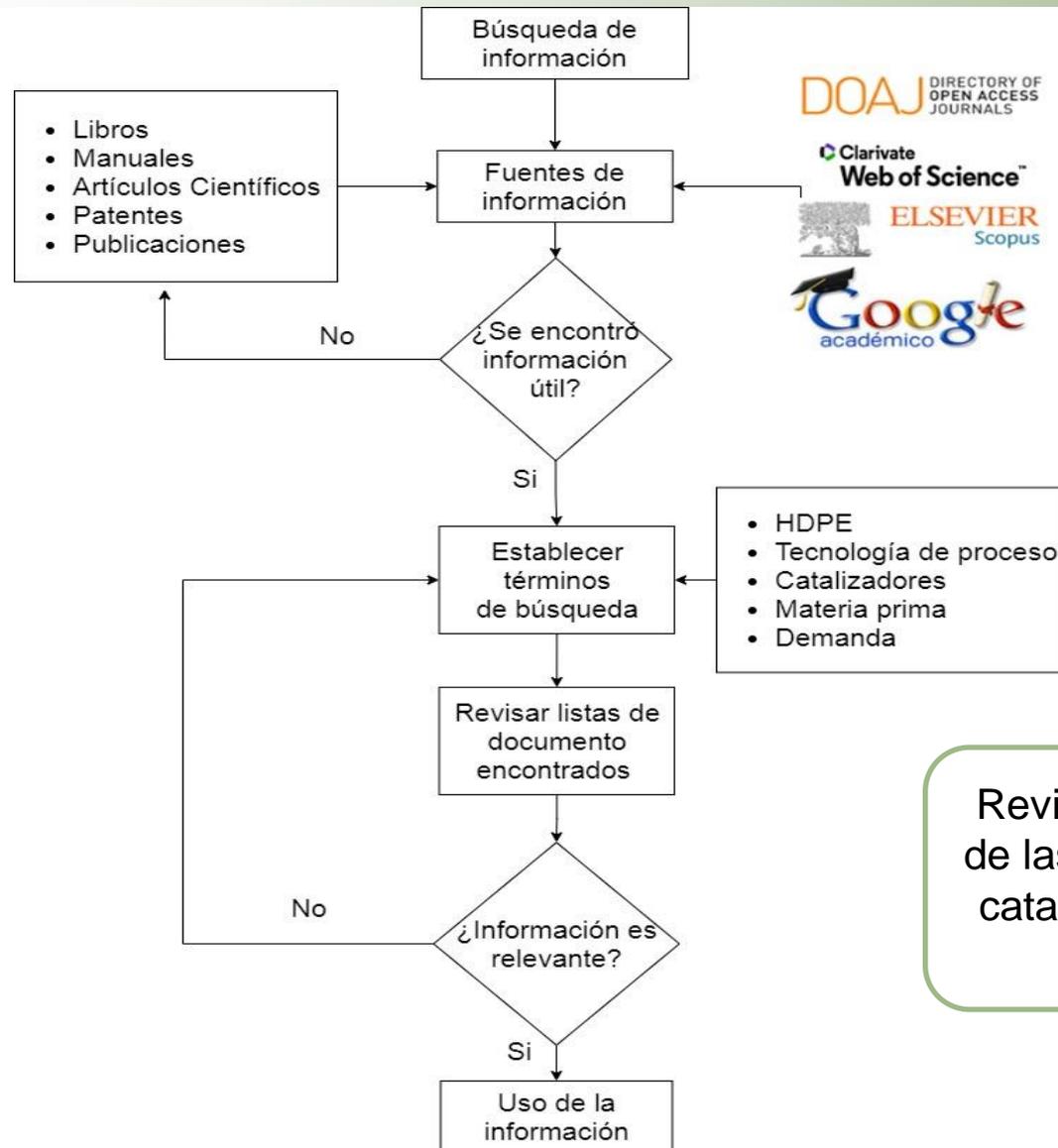
OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES



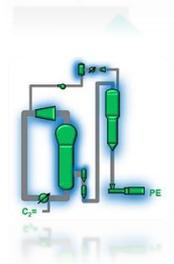


Revisión del estado del arte de las tecnologías, reactivos, catalizadores y condiciones de operación.

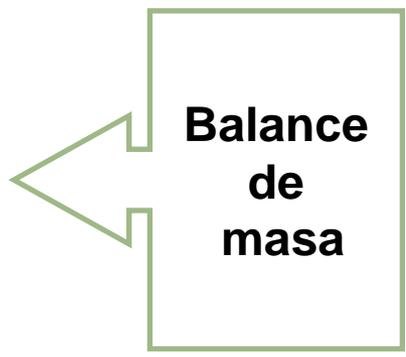




Manual



Simulador de procesos químicos

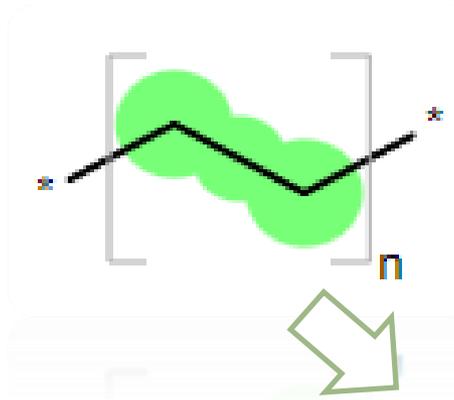


Manual

Simulador



Revisión Bibliográfica



- *IBM RXN for Chemistry*
- *SciFinder*



CONTENIDO

INTRODUCCIÓN

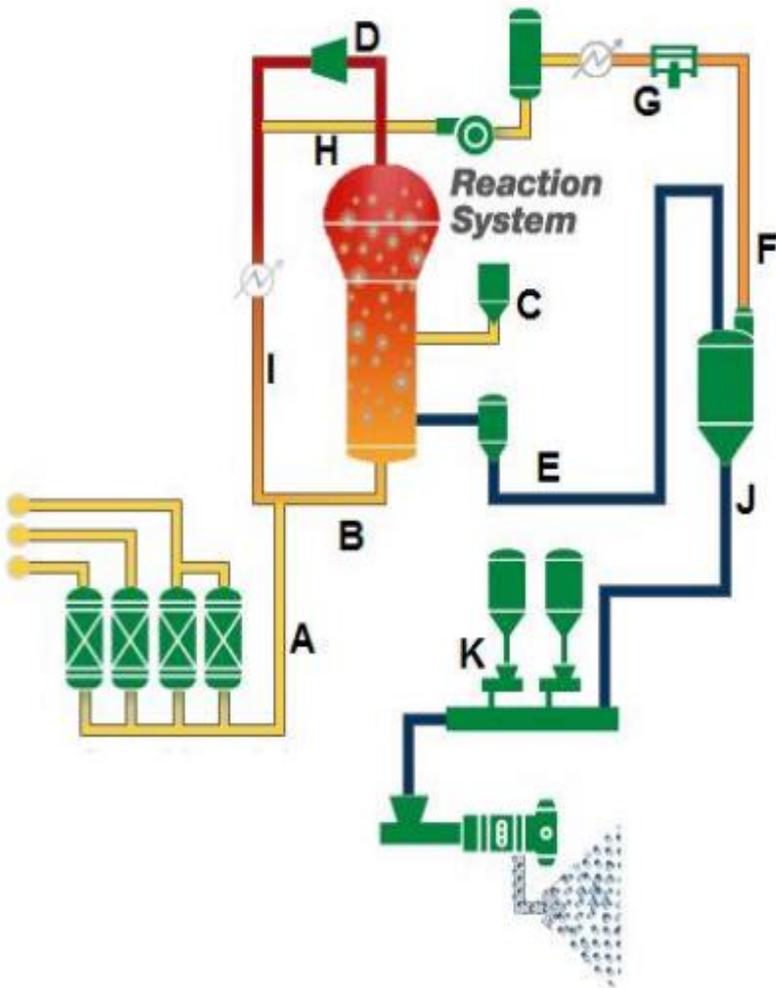
OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES





Tecnología UNIPOL, Tomado de Univation Technologies

Relación de polimerización	1 mol de etileno → 1 mol de polietileno
Temperatura de reactor	80°C
Presión	30 bar
Conversión del etileno por paso en el reactor	3.33 %
Catalizador	20 Kg de polietileno / 1 g de cat. 20000 g polietileno / g de cat.
Aditivo	5.572701% en peso
Relación: Nitrógeno/catalizador	1/8
Recirculación del hidrógeno al inicio del proceso	10%
Concentración recomendada de etileno e hidrógeno (datos experimentales)	$C_2H_4 = (4 \times 10^{-4} \text{ mol/m}^3) \times (28 \text{ g/mol}) = 0,0112 \text{ g/m}^3$ $H_2 = (9,6 \times 10^{-5} \text{ mol/m}^3) \times (2 \text{ g/mol}) = 0,000192 \text{ g/m}^3$
Relación en masa de etileno a hidrógeno	58,33

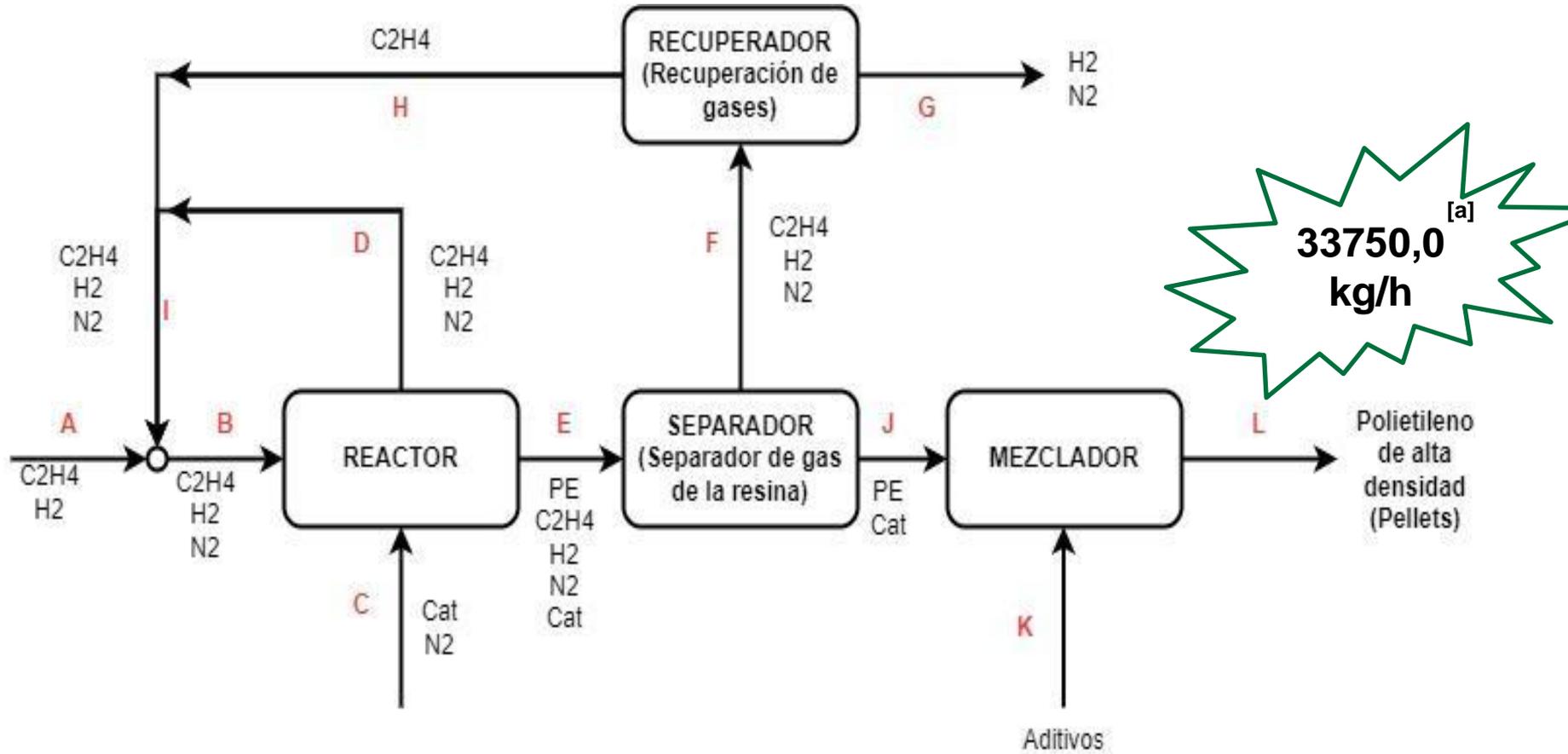
Datos técnicos para el desarrollo del balance másico del proceso UNIPOL, Tomados de (Farid et al., 2012)



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

Diagrama de bloques para el balance másico del proceso



Tecnología UNIPOL, Adaptado de Univation Technologies

[a]: Instituto Nacional de Estadísticas y Censos (INEC)



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

Balance de masa manual

Flujo másico

[kg/h]

Componentes	A	B	C	D	E	F
Etileno	31860	965454,57		840235,11	93359,46	93359,46
Hidrógeno	540	606,97		60,07	60,07	60,07
Catalizador			1,59		1,59	
Nitrógeno		12,75	12,75	12,75	12,75	12,75
HDPE					31879,45	
Aditivos						
Total	32400	966074,28	14,34	840307,93	125313,91	93432,27



Balance de masa manual

Flujo másico

[kg/h]

Componentes	G	H	I	J	K	L
Etileno		93359,46	93359,46			
Hidrógeno	60,07		60,07			
Catalizador				1,59		1,59
Nitrógeno	12,75		12,75			
HDPE				31858,04		31858,04
Aditivos					1880,78	1880,78
Total	72,82	93359,46	933667,39	31859,63	1880,78	33750,42



Balance de masa por
simulación



Comprobación



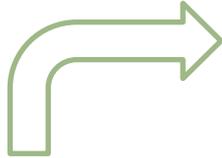
Simulador
de procesos
químicos

Flujos máxicos obtenidos para los límites del reactor

FLUJOS MÁXICOS [kg/h]			
Corrientes	Manual	Simulador	% Error
A	32400	32968,5	1,75
B	966074,28	962649	0,32
C	14,341	14,3243	0,12
D	840307,93	837715	0,31
E	125313,911	124949	0,29
F	93432,27	93079,4	0,38



1 mol de etileno → 1 mol de polietileno

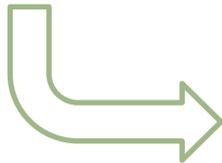


Rendimiento teórico

	FLUJOS MÁSICOS [kg/h]
	Manual
ETILENO	31860
HDPE	31858.04

$$\text{rendimiento manual} = \frac{31858.04}{31860}$$

$$\text{rendimiento manual} = 99.99\%$$



	FLUJOS MÁSICOS [kg/h]
	Simulador
ETILENO	32413.4
HDPE	31867.6

$$\text{rendimiento por sim.} = \frac{31867.6}{32413.4}$$

$$\text{rendimiento por sim.} = 98.32\%$$

Rendimiento real



$$\text{rendimiento real} = 91\%$$

Patente: US 8,420,754 B2
(Cann et al., 2013)

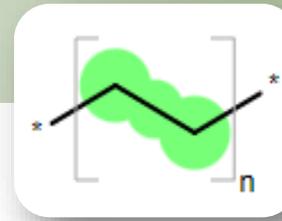
$$\text{rendimiento real} = 97\%$$

(Barcia, 2017)



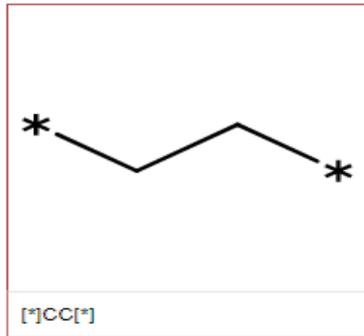
ANÁLISIS DE RESULTADOS

20

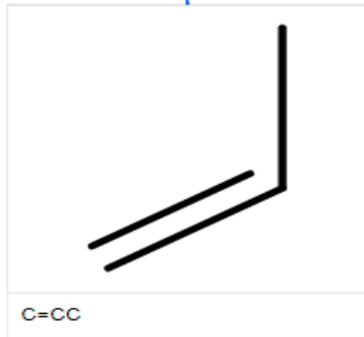


Retrosíntesis de producto final

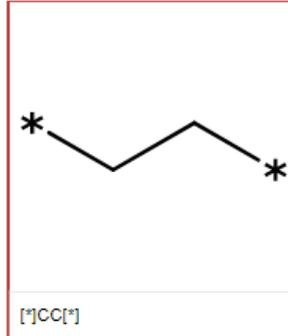
a)



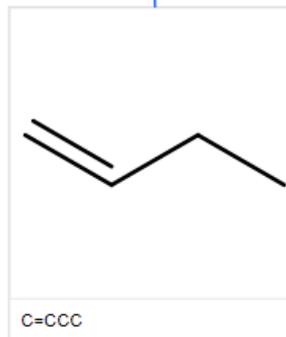
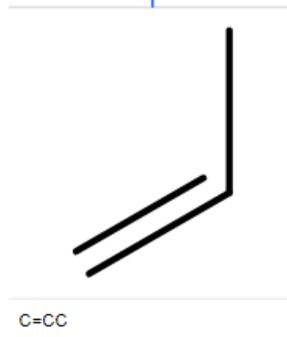
5.600e-25 - ...



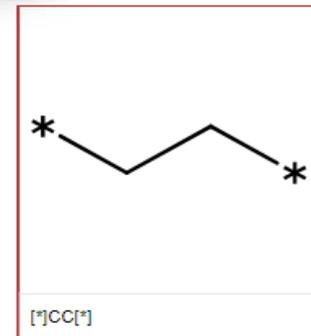
b)



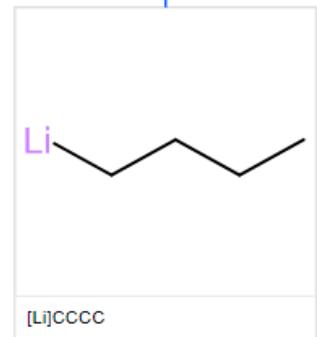
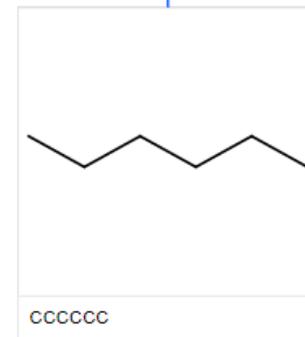
5.994e-24 - ...



c)



2.549e-23 - ...



Resultados de la exploración de las vías de retrosíntesis mediante IBM RXN



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

CONTENIDO

INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES

CONCLUSIONES

- De la revisión bibliográfica realizada se expusó las tres principales tecnologías de proceso en la producción de HDPE las cuales fueron: en suspensión (Slurry), en solución (Dowlex) y en fase gas (UNIPOL) siendo la última de estas la tecnología mas adecuada para cubrir la demanda actual que tiene el país la cual corresponde a 270 000 ton/año.
- Se logró exponer los cálculos de las proporciones estequiométricas, balances de masa, rendimientos reales y teóricos del polímero comercial polietileno (HDPE) en base a la tecnología de proceso seleccionada "UNIPOL".
- Para el desarrollo de la reacción de polimerización se emplea catalizadores de óxido de cromo, conocidos como catalizadores "Phillips" ya que son los más utilizados en procesos de polimerización en fase líquida y gaseosa, además que representan aproximadamente el 70% en la producción mundial de HDPE.



CONCLUSIONES

- El rendimiento alcanzado de manera manual corresponde a un valor del 99,99% y con la asistencia de un simulador de procesos químicos el rendimiento fue del 98,32%. Se puede observar que los rendimientos obtenidos a través de los dos métodos presentan una gran similitud. Por otra parte en base a la revisión bibliográfica, el autor Cann et al., (2013) reporta un rendimiento real del proceso correspondiente al 91% en su patente (US 8,420,754 B2) y Barcia (2017) reporta un rendimiento de procedo del 97% para la producción del HDPE.
- Mediante la herramienta tecnológica *IBM RXN for Chemistry* se hallaron tres diferentes mecanismos de reacción para la obtención del polietileno, siendo estas: 1) a través de la molécula propileno. 2) La reacción entre el propileno y el butileno, 3) y la combinación de las moléculas hexano y butilitio. Dichas reacciones son alternativas ya que el método convencional en la obtención de polietileno es directamente a partir de su monómero (etileno).



RECOMENDACIONES

- Implementar al presente estudio bibliográfico el desarrollo de un análisis de costos en donde se detallen aspectos como costos de los equipos, mano de obra, materia prima, costos de mantenimiento y reparación entre otras, para la tecnología UNIPOL.
- Aportar con un estudio complementario en relación a aspectos ambientales para la producción del polietileno y describir técnicas más amigables con el medio ambiente.
- Profundizar en el manejo de las herramientas tecnológicas *SciFinder* e *IBM RXN for Chemistry* ya que nos permite obtener diferentes rutas retro sintéticas de diversas moléculas químicas.



GRACIAS



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA